UNIÓN INTERNACIONAL DE QUÍMICA PURA Y APLICADA
DIVISIÓN DE NOMENCLATURA QUÍMICA Y REPRESENTACIÓN ESTRUCTURAL

NOMENCLATURA DE QUÍMICA ORGÁNICA
FUNDAMENTOS DEL LIBRO AZUL 2020

Guía Breve para la Nomenclatura en Química Orgánica

K.-H. Hellwich (Alemania), R. M. Hartshorn (Nueva Zelanda), A. Yerin (Rusia), T. Damhus (Dinamarca), A. T. Hutton (Sudáfrica). C/e: organic.nomenclature@iupac.org Organismo patrocinador: División de Nomenclatura Química y Representación Estructural de la IUPAC

Traducido y adaptado por: Efraím Reyes (España), Pascual Román Polo (España). C/e: efraim.reyes@ehu.es

1 INTRODUCCIÓN

La adopción universal de una nomenclatura consensuada es una herramienta clave para la comunicación eficiente en las ciencias químicas, en la industria y en las regulaciones asociadas con la importación/exportacion o la salud y la seguridad. La Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC en sus siglas inglesas) ofrece recomendaciones sobre muchos aspectos de la nomenclatura.[1] Los fundamentos de la nomenclatura orgánica se muestran aquí, y los documentos complementarios sobre la nomenclatura de química inorganica,[2] y polímeros,[3] con enlaces a los documentos originales. Un resumen general de la nomenclatura química se puede encontrar en *Principles of Chemical Nomenclature*.[4] Una descripción exhaustiva se puede hallar en *Nomenclature of Organic Chemistry*, coloquialmente conocido como el Libro Azul,[5] y en publicaciones relacionadas para los compuestos inorgánicos (el Libro Rojo),[6] y polímeros (el Libro Púrpura).[7]

Cabe señalar que muchos compuestos pueden tener nombres no-sistemáticos o semisistemáticos y las reglas de la IUPAC también permiten dar más de un nombre sistemático en muchos casos. Algunos nombres tradicionales (por ejemplo estireno, urea) también se usan con la nomenclatura sitemática. La nueva edición del Libro Azul[5] incorpora una serie de criterios jerárquicos para elegir el nombre individual preferido a efectos de regulación (Preferred IUPAC Name, o PIN).

2 NOMENCLATURA SUSTITUTIVA

La nomenclatura sustitutiva (o de sustitución) es el método principal para nombrar los compuestos químicos orgánicos. Se utiliza principalmente para los compuestos de carbono y elementos de los grupos 13-17. Con fines de nomenclatura, un compuesto químico se trata como la combinación de un compuesto progenitor (Sección 5) y grupos (funcionales) característicos, uno de los cuales se denomina grupo característico principal (Sección 4). Un nombre sistemático se basa en el nombre del compuesto progenitor de mayor jerarquía (Sección 6) en el cual la sustitución de átomos de hidrógeno se representa con un sufijo para el grupo o grupos característicos principales, prefijos que representan los grupos característicos de menor jerarquía y otros grupos sustituyentes, y localizadores que especifican sus posiciones. Los nombres creados siguiendo la nomenclatura sustitutiva pueden incluir también fragmentos nombrados de acuerdo con otros tipos u operaciones de nomenclatura. Por ejemplo, las operaciones de adición y sustracción (Sección 5.4) se realizan principalmente para definir el estado de hidrogenación, mientras que una operación de reemplazo define un cambio de (en la mayoría de los casos) átomos de carbono por heteroátomos.

2.1 Componentes de los nombres sustitutivos sistemáticos

Los componentes más comunes de un nombre químico sustitutivo se ilustran con referencia a la estructura química mostrada en la Tabla 1, junto con su nombre sistemático y los componentes de dicho nombre.

Los localizadores indican la posición de los sustituyentes u otras características estructurales. Generalmente, se colocan antes de la parte del nombre que indica la característica estructural correspondiente. Se usan tres tipos de marcas inclusivas, en el orden de anidación {[( )]}, cuando sea necesario indicar qué partes de un nombre van juntas.

Para citar la versión original en inglés, por favor, use: IUPAC, *Pure Appl. Chem.* 2020, https://doi.org/10.1515/pac-2019-0104. Se permite la publicación de este documento por cualquier medio bajo la condición de que sea completa e inalterada.

[1] Disponible gratuitamente en: (a) https://www.degruyter.com/view/j/pac; (b) https://www.qmul.ac.uk/sbcs/iupac/.

[2] R. M. Hartshorn *et al.*, Brief Guide to the Nomenclature of Inorganic Chemistry, *Pure Appl. Chem.* **87**(9–10), 1039–1049 (2015).

[3] R. C. Hiorns *et al.*, A Brief Guide to Polymer Nomenclature, *Pure Appl. Chem.* **84**(10), 2167–2169 (2012).

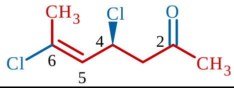
[4] G. J. Leigh (Ed.), *Principles of Chemical Nomenclature – A Guide to IUPAC Recommendations, 2011 Edition*, RSC Publishing, Cambridge, U.K., ISBN 978-1-84973-007-5.

[5] H. A. Favre, W. H. Powell (Eds.), *Nomenclature of Organic Chemistry – IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013*, Royal Society of Chemistry, Cambridge, U.K., ISBN 978-0-85404-182-4; corrección, modificación y extensión: https://www.qmul.ac.uk/sbcs/iupac/bibliog/BBerrors.html.

[6] N. G. Connelly, T. Damhus, R. M. Hartshorn, A. T. Hutton (Eds.), *Nomenclature of Inorganic Chemistry – IUPAC Recommendations 2005*, RSC Publishing, Cambridge, U.K., ISBN 0-85404-438-8.

[7] R. G. Jones, J. Kahovec, R. Stepto, E. S. Wilks, M. Hess, T. Kitayama, W. V. Metanomski (Eds.), *Compendium of Polymer Terminology and Nomenclature – IUPAC Recommendations 2008*, RSC Publishing, Cambridge, U.K., ISBN 978-0-85404-491-7.

Tabla 1. Componentes del nombre sustitutivo
(4*S*,5*E*)-4,6-diclorohept-5-en-2-ona **para**



hept(a)	compuesto progenitor (heptano)	ona	sufijo para el grupo característico principal
en(o)	terminación de insaturación	cloro	prefijo sustituyente
di	prefijo multiplicador	*S E*	estereodescriptores
2 4 5 6	localizadores	( )	marcas inclusivas

Los prefijos multiplicadores (Tabla 2) se usan cuando más de un fragmento de idéntico tipo se halla en una estructura. La clase de prefijo multiplicador que se emplea depende de la complejidad del fragmento correspondiente – p. ej. tricloro, pero, en cambio, tris(clorometil).

Tabla 2. Prefijos multiplicadores para las entidades simples y complejas

Nº	Simple	Compleja	Nº	Simple	Compleja
2	di	bis	8	octa	octakis
3	tri	tris	9	nona	nonakis
4	tetra	tetrakis	10	deca	decakis
5	penta	pentakis	11	undeca	undecakis
6	hexa	hexakis	12	dodeca	dodecakis
7	hepta	heptakis	20	icosa	icosakis

3 CREACIÓN DE LOS NOMBRES SISTEMÁTICOS

La formación de un nombre sistemático requiere de diversas etapas, que se han de seguir (cuando sean aplicables) en el orden siguiente:

a. Determine el grupo característico principal que se ha de citar como sufijo (véase la Sección 4).

b. Determine el compuesto progenitor de mayor jerarquía entre aquellos componentes estructurales unidos al grupo característico principal (véanse las Secciones 5 y 6).

c. Nombre el hidruro progenitor y especifique cualquier insaturación (Sección 5).

d. Combine el nombre del hidruro progenitor con el sufijo para el grupo característico principal (Sección 4).

e. Identifique los sustituyentes y ordene los correspondientes prefijos según orden alfabético.

f. Inserte los prefijos multiplicadores, sin cambiar el orden ya establecido, y añada los localizadores.

g. Determine los centros estereogénicos y otras unidades esterogénicas, tales como dobles enlaces y añada los correspondientes estereodescriptores.

4 GRUPOS CARACTERÍSTICOS. Sufijos y prefijos

La presencia de un grupo característico (o funcional) se indica con un prefijo o un sufijo unido al nombre del compuesto progenitor. Los nombres de los grupos característicos comunes figuran en la Tabla 3, en orden de jerarquía decreciente. El de mayor jerarquía, el grupo característico principal, se cita como sufijo, mientras que todos los otros grupos se citan como prefijos. Nótese que para fines de nomenclatura, los enlaces multiples C–C no se consideran grupos característicos (Sección 5.4).

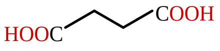
Table 3. Orden jerárquico para los grupos característicos

Clase	Fórmula*	Sufijo	Prefijo
carboxilatos	$-COO^-$ $-(C)OO^-$	-carboxilato -oato	carboxilato
ácidos carboxílicos	–COOH –(C)OOH	acido -carboxílico ácido -oico	carboxi
ésteres	–COOR –(C)OOR	-carboxilato de (R)** -oato de (R)**	(R)oxicarbonil
haluros de ácido	–COX –(C)OX	haluro de -carbonilo haluro de -oilo	halocarbonil
amidas	$-CONH_2$ $-(C)ONH_2$	-carboxamida -amida	carbamoil
nitrilos	–C≡N –(C)≡N	-carbonitrilo -nitrilo	ciano
aldehídos	–CHO –(C)HO	-carbaldehído -al	formil oxo
cetonas	=O	-ona	oxo
alcoholes	–OH	-ol	hidroxi
tioles	–SH	-tiol	sulfanil***
aminas	$-NH_2$	-amina	amino
iminas	=NH	-imina	imino

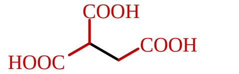
* Aquí –(C) indica que el átomo de carbono está incluido en el nombre del compuesto progenitor.
** Aquí (R) significa que el grupo R se expresa como una palabra separada.
*** NOTA. El término “mercapto” ya no se acepta (pero todavía se usa por el CAS).

Versión 1.0, diciembre de 2021 (correspondiente con la Version 1.1, June 2021 inglesa)

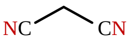
Dependiendo del número y disposición de los grupos carbonados nombrados como de sufijos, el átomo de carbono puede ser parte del compuesto progenitor (p. ej. –(C)OOH, "ácido –oico") o se puede tratar como grupo unido al compuesto progenitor (p. ej. –COOH, "ácido –carboxílico")



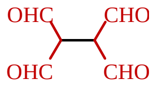
ácido butanodioico



ácido etano-1,1,2-tricarboxílico

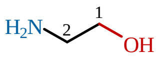


propanodinitrilo

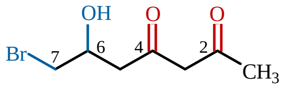


etano-1,1,2,2-tetracarbaldehído

Otros grupos característicos en un compuesto progenitor se representan con los prefijos correspondientes citados en orden alfabético (aquí en azul, donde R representa un grupo alquilo o arilo), incluyendo también éteres (–OR), (R)oxi; sulfuros (–SR), (R)sulfanil; bromuros (–Br), bromo; cloruros (–Cl), cloro; fluoruros (–F), fluoro; yoduros (–I), yodo (preferible a iodo); y grupos nitro ($-NO_2$), nitro.



2-aminoetan-1-ol



7-bromo-6-hidroxiheptano-2,4-diona

5 COMPUESTOS PROGENITORES, HIDRUROS PROGENITORES

La nomenclatura sustitutiva se emplea para diversos tipos de compuestos progenitores. Los compuestos progenitores sin grupos característicos se denominan hidruros progenitores. Estos hidruros se pueden clasificar según sea de cadena o cíclicos (de anillo), y pueden contener átomos de carbono y/o heteroátomos. Los compuestos progenitores con anillos pueden ser monocíclicos, policíclicos con puente (anillos que comparten más de dos átomos), policíclicos condensados (anillos que comparten dos átomos vecinos) o policíclicos espiránicos (anillos que comparten un solo átomo). Los compuestos progenitores más complejos incluyen sistemas fusionados con puentes, asociación de anillos, ciclofanos y fullerenos. La numeración de los átomos de un compuesto progenitor se define mediante reglas propias para cada tipo de compuesto progenitor. A partir de aquí, se aplican las reglas descritas en la Sección 7.

5.1 Hidruros progenitores acíclicos

Los nombres de las cadenas saturadas de carbono (alcanos) se componen del término numérico simple que indica el número de átomos de carbono (Tabla 2, con la "a" elidida) junto con la terminación "ano" (véase la Tabla 4), con la excepción de los primeros cuatro alcanos: metano, CH_4; etano, CH_3CH_3; propano, $CH_3CH_2CH_3$; butano, $CH_3[CH_2]_2CH_3$.

Tabla 4. Nombres para algunos alcanos lineales

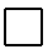
$CH_3[CH_2]_3CH_3$	$CH_3[CH_2]_7CH_3$	$CH_3[CH_2]_{18}CH_3$
pentano	nonano	icosano
$CH_3[CH_2]_4CH_3$	$CH_3[CH_2]_{16}CH_3$	$CH_3[CH_2]_{20}CH_3$
hexano	octadecano	docosano

5.2 Hidruros progenitores monocíclicos

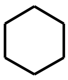
Los nombres de los hidrocarburos saturados monocíclicos (cicloalcanos) están compuestos por el prefijo "ciclo" y el nombre del alcano correspondiente.



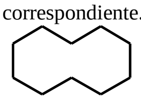
ciclopropano



ciclobutano



ciclohexano

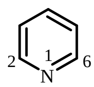


ciclodecano

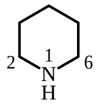
Se conservan varios nombres no sistemáticos para anillos comunes, por ejemplo, benceno y los siguientes heterociclos.



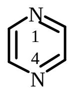
benceno



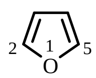
piridina



piperidina



pirazina



furano

Los nombres sistemáticos para anillos monocíclicos que contienen heteroátomos se construyen de acuerdo con el sistema de Hantzsch-Widman (HW) (anillos de 3 a 10 miembros) o la nomenclatura de reemplazo (anillos más grandes).[4,5] Ambos sistemas usan los prefijos "a" que se muestran en la Tabla 5, en los que la jerarquía disminuye de izquierda a derecha en la primera fila y luego en la segunda fila.

El sistema H-W combina los prefijos "a" de la Tabla 5 en orden decreciente de jerarquía con las terminaciones, en el sistema H-W llamados tallos (*stems*), que indican el tamaño y la saturación del anillo (Tabla 6).

Tabla 5. Prefijos "a" seleccionados para los sistemas H-W y de reemplazo

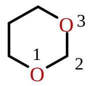
O	oxa	S	tia	N	aza	P	fosfa
As	arsa	Si	sila	Sn	estanna	B	bora

Se agregan los localizadores apropiados para describir la ubicación de los reemplazos en el anillo y la vocal "a" se elide cuando va seguida de una vocal. Si hay más de 10 átomos en el anillo, se usa la nomenclatura de reemplazo, en la que los prefijos "a" se enumeran nuevamente en orden decreciente de jerarquía, con los localizadores correspondientes, delante del nombre del compuesto progenitor. La numeración de los átomos se explica en la Sección 7.

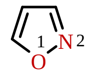
Tabla 6. Terminaciones en el sistema de Hantzsch-Widman

Tamaño del anillo	*Insaturado*	*Saturado*
3	irino* / ireno	iridino / irano**
4	eto	etidino / etano**
5	ol	olidino / olano**
6	ino / ino / inino***	ano / inano / inano***
7	epino	epano

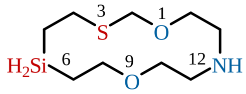
* Para anillos con N como único(s) heteroátomo(s). ** Para anillos con/sin N como heteroátomo(s). *** Siendo O,S / N,Si,Sn / P,As,B el heteroátomo citado al final, respectivamente.



1,3-dioxano



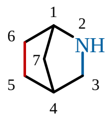
1,2-oxazol



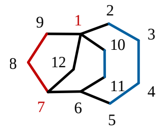
1,9-dioxa-3-tia-12-aza-6-silaciclotetradecano

5.3 Hidruros progenitores policíclicos

Los nombres de los **sistemas policíclicos tipo puente** se basan en el nombre del alcano que contendría el mismo número de átomos de carbono, precedido por un indicador de número de ciclos presentes y de un descriptor de puente que define los tamaños de los diversos anillos; este descriptor proporciona el número de átomos del esqueleto en cada uno de los puentes que conectan las cabezas de puente y viene dado por números arábigos citados en orden numérico descendente, separados por puntos e incluidos entre corchetes. La numeración comienza en una cabeza de puente y recorre los anillos en orden (de mayor a menor). La nomenclatura de reemplazo (véase la Sección 5.2) se emplea para nombrar los heterociclos relacionados.

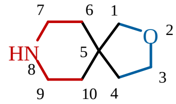


2-azabiciclo[2.2.1]heptano

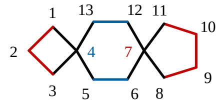


triciclo[4.3.2.1^{1,7}]dodecano

Los nombres de los **sistemas policíclicos espiránicos**, en los que hay un solo átomo en común en los anillos, incluyen el número de uniones espiránicas, un descriptor de puente y el nombre del alcano que contendría el mismo número de átomos de carbono. Como en la sección anterior, los heterociclos relacionados se nombran de acuerdo con la nomenclatura de reemplazo (véase la Sección 5.2).

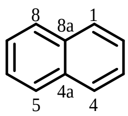


2-oxa-8-azaespiro[4.5]decano

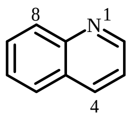


diespiro[3.2.4^7.2^4]tridecano

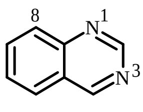
Los **policiclos fusionados** son sistemas cíclicos que tienen un enlace común para cualquier par de anillos adyacentes.



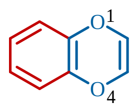
naftaleno



quinolina

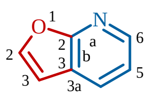


quinazolina

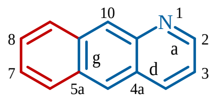


1,4-benzodioxino

En la nomenclatura sistemática de policiclos fusionados se combinan los nombres de los componentes y se añade un descriptor de fusión que indica cómo están conectados dichos componentes. Este proceso está más allá del alcance de esta guía (consulte la referencia 5 para obtener más detalles).



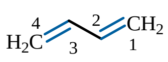
furo[2,3-*b*]piridina



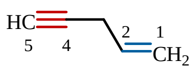
benzo[*g*]quinolina

5.4 Saturación e insaturación

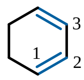
El grado de insaturación de un compuesto en comparación con el compuesto progenitor saturado se puede indicar reemplazando la terminación "ano" por las terminaciones "eno" e "ino" que definen la presencia de enlaces dobles y triples, respectivamente, y la adición de localizadores para mostrar sus posiciones.



buta-1,3-dieno

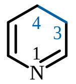


pent-1-en-4-ino

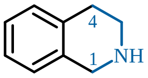


ciclohexa-1,3-dieno

La adición de hidrógeno a los hidruros progenitores insaturados se indica con la inserción de prefijos “hidro” para indicar la saturación de dobles enlaces, de nuevo con localizadores para definir dónde ocurre.

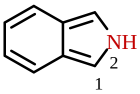


3,4-dihidropiridina

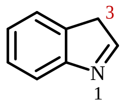


1,2,3,4-tetrahidroisoquinolina

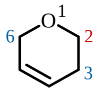
Para algunos hidruros progenitores insaturados, las posiciones saturadas se especifican usando la convención de indicación de hidrógeno (*H*).



2*H*-isoindol



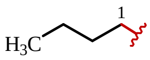
3*H*-indol



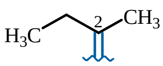
3,6-dihidro-2*H*-pirano

5.5 Grupos sustituyentes derivados de hidruros progenitores

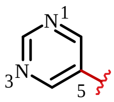
En los casos en los que un grupo derivado de un hidruro progenitor sea un sustituyente de otro compuesto progenitor, el nombre del sustituyente se crea mediante la adición de los sufijos “il” o “ilideno” al nombre del hidruro progenitor, con los localizadores correspondientes que indican la posición de la unión. Las posiciones de unión expresadas por los sufijos “il” o “ilideno” son prioritarios a cualquier grupo característico (consulte la Sección 4, Tabla 3).



butil



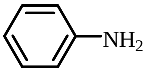
butan-2-ilideno



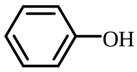
pirimidin-5-il

5.6 Compuestos progenitores funcionales

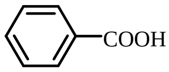
La combinación de un hidruro progenitor con un grupo funcional puede formar un compuesto progenitor funcional el cual es nombrado como una única entidad. Tales nombres se utilizan como nombres sistemáticos solamente si expresan tanto el compuesto progenitor como el grupo característico de mayor jerarquía del compuesto considerado, p. ej. 4-cloroanilina, pero, en cambio, ácido 4-aminobenzoico (no 4-carboxianilina ni ácido anilino-4-carboxílico).



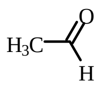
anilina



fenol



ácido benzoico

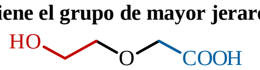


acetaldehído

6 JERARQUÍA DE LOS COMPUESTOS PROGENITORES

El nombre sistemático se basa en el nombre del compuesto progenitor de mayor jerarquía, que se elige aplicando los siguientes criterios en el orden que se describe a continuación y se muestran en la Figura 1, hasta que se toma una decisión. Para consultar el conjunto completo de criterios, véase la referencia 8. En los siguientes ejemplos, el compuesto progenitor de mayor jerarquía se muestra en azul, y se indica la razón clave en el texto adyacente.

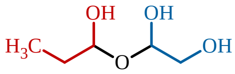
a. Contiene el grupo de mayor jerarquía (grupo característico principal)



ácido (2-hidroxietoxi)acético

el ácido tiene mayor jerarquía que el alcohol

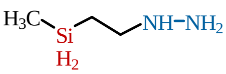
b. Contiene máximo número de grupos de mayor jerarquía



1-(1-hidroxipropoxi)etano-1,2-diol

el compuesto progenitor con dos grupos característicos tiene mayor jerarquía

c. El compuesto progenitor está basado en un elemento de mayor jerarquía (N, P, Si, B, O, S, C)



[2-(metilsilil)etil]hidrazina

la hidrazina tiene mayor jerarquía que el silano (N tiene mayor jeraquía que Si)

d. Los ciclos tienen mayor jerarquía que las cadenas si se componen de los mismos elementos



pentilciclobutano

el ciclobutano tiene mayor jerarquía que el pentano

NOTA 1: Después de este criterio, solo quedan anillos o solo cadenas para una elección posterior.
NOTA 2: En recomendaciones anteriores, la jerarquía dependía del número de átomos.

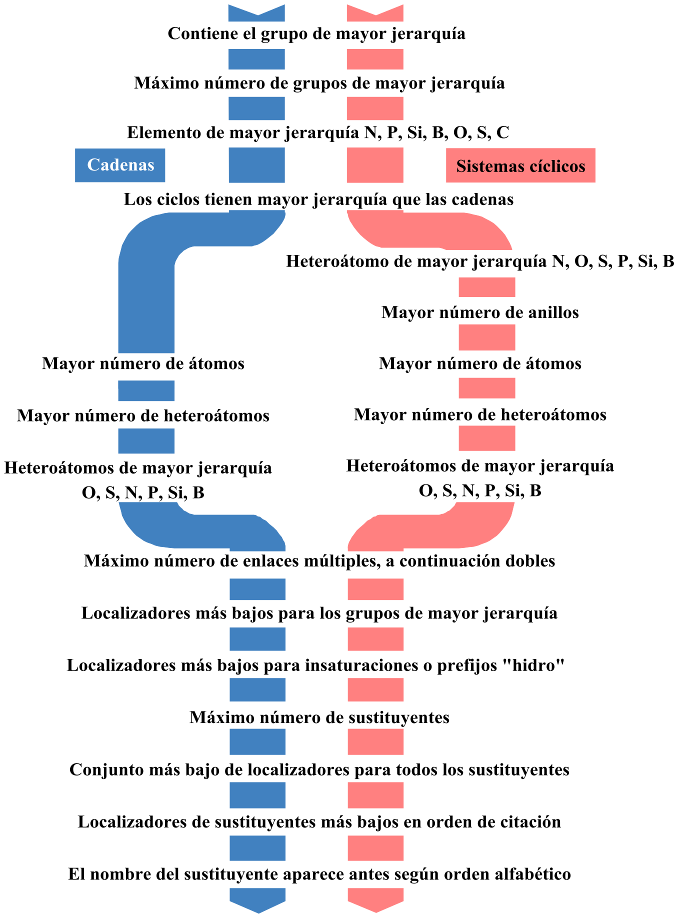
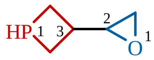


Figura 1. Criterios para elegir el compuesto progenitor de mayor jerarquía

e. Criterios para sistemas cíclicos

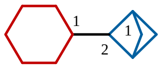
e.1. Contiene el heteroátomo de mayor jerarquía en el orden N, O, S, P, Si, B.



(fosfetan-3-il)oxirano

el O-anillo tiene mayor jerarquía que el P-anillo

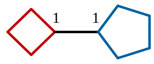
e.2. Contiene mayor número de anillos



2-ciclohexilbiciclo[1.1.1]pentano

el biciclo tiene mayor jerarquía que el monociclo

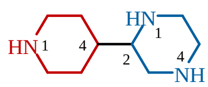
e.3. Contiene mayor número de átomos



ciclobutilciclopentano

el ciclopentano tiene mayor jerarquía que el ciclobutano

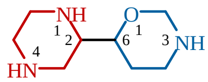
e.4. Contiene mayor número de heteroátomos



2-(piperidin-4-il)piperazina

la piperazina, al tener dos heteroátomos, tiene mayor jerarquía que la piperidina

e.5. Contiene más heteroátomos de mayor jerarquía

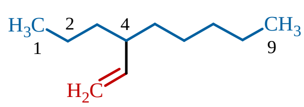


6-(piperazin-2-il)-1,3-oxazinano

el oxazinano, que contiene O y N, tiene mayor jerarquía que la piperazina con dos átomos de N

f. Criterios para cadenas

f.1. Contiene mayor número de átomos



4-etenilnonano

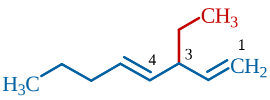
una cadena de nueve átomos, tiene mayor jerarquía que una de ocho (incluso si tiene menos dobles enlaces)

NOTA. En recomendaciones anteriores, la insaturación tenía mayor jerarquía que la longitud de la cadena.

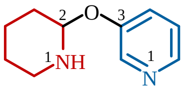
[8] Sección P-52 de la referencia 5.

Los siguientes criterios se aplican tanto a las cadenas como a los anillos:

g. Contiene máximo número de enlaces múltiples, y a continuación, dobles

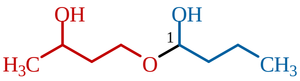


3-etilocta-1,4-dieno



3-[(piperidin-2-il)oxi]piridina

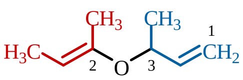
h. Presenta los localizadores más bajos para los grupos de mayor jerarquía



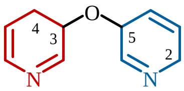
1-(3-hidroxibutoxi)butan-1-ol

el butan-1-ol tiene mayor jerarquía que el butan-2-ol

i. Presenta localizadores más bajos para insaturaciones o prefijos "hidro"

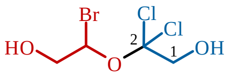


3-[(but-2-en-2-il)oxi]but-1-eno



5-[(3,4-dihidropiridin-3-il)oxi]-2,5-dihidropiridina

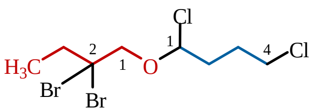
j. Contiene el máximo número de sustituyentes



2-(1-bromo-2-hidroxietoxi)-2,2-dicloroetan-1-ol

el compuesto progenitor con tres sustituyentes tiene mayor jerarquía que el compuesto progenitor con dos sustituyentes

k. Presenta el conjunto más bajo de localizadores para todos los sustituyentes

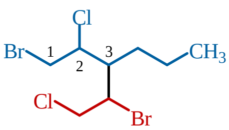


todos los localizadores del compuesto progenitor están dispuestos en orden creciente y comparados de uno en uno: 1,1,4 es menor que 1,2,2

1,4-dicloro-1-(2,2-dibromobutoxi)butano

NOTA. No 2,2-dibromo-1-(1,4-diclorobutoxi)butano

l. Presenta localizadores de sustituyentes más bajos en orden de citación

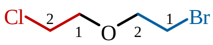


1,3,2 es más bajo que 2,3,1

1-bromo-3-(1-bromo-2-cloroetil)-2-clorohexano

NOTA. No 2-bromo-3-(2-bromo-1-cloroetil)-1-clorohexano

m. El nombre del sustituyente aparece antes según orden alfabético



bromo se cita antes que cloro

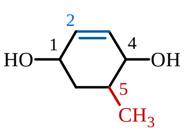
1-bromo-2-(2-cloroetoxi)etano

NOTA. No 1-(2-bromoetoxi)-2-cloroetano

7 NUMERACIÓN DE LOS COMPUESTOS PROGENITORES

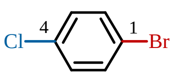
La numeración del compuesto progenitor se determina según el tipo de compuesto y a continuación se elige considerando todos los conjuntos posibles de localizadores y aplicando sucesivamente los siguientes criterios:

a. Los localizadores más bajos para los heteroátomos;
b. Los localizadores más bajos para el indicador de hidrógeno (*H*);
c. Los localizadores más bajos para los grupos característicos principales;
d. Los localizadores más bajos para "eno", "ino" y prefijos "hidro";
e. Los localizadores más bajos para el conjunto de todos los sustituyentes citados como prefijos;
f. Los localizadores más bajos para los sustituyentes en orden de citación



a. y b.	no se aplican;
c.	comience en el C al que está unido un OH;
d.	numere en dirección al doble enlace;
e.	elija la numeración que coloque al CH_3 en la posición 5 y no en la posisión 6.

5-metilciclohex-2-eno-1,4-diol



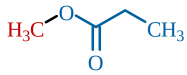
a. – e.	no se aplican;
f.	bromo se cita antes que cloro en el nombre y, por tanto, recibe el localizador más bajo.

1-bromo-4-clorobenceno (no 4-bromoclorobenceno)

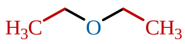
La numeración correcta es extremadamente importante, porque un solo localizador incorrecto hace imposible que el lector del nombre pueda hallar la estructura correcta.

8 NOMENCLATURA DE CLASE FUNCIONAL

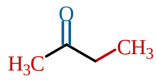
Los nombres de clase funcional (anteriormente, nombres radicofuncionales) se prefieren para los ésteres y los haluros de ácido. Para otras clases de compuestos (p. ej. éteres, cetonas, sulfóxidos y sulfonas) todavía se emplean los nombres de clase funcional, aunque se prefieren los nombres sustitutivos. Los nombres de clase funcional constan de uno o más nombres de sustituyentes, ordenados alfabéticamente y seguidos del nombre del tipo de compuesto (separados con espacios o la preposición "de"). Por tanto, $CH_3C(O)O–CH_3$ se denomina acetato de metilo, $ClCH_2C(O)O–CH_3$ es cloroacetato de metilo, $CH_3C(O)–Cl$ es cloruro de acetilo, $C_6H_5C(O)–Br$ es bromuro de benzoílo, y $(H_3C)_2SO_2$ se denomina dimetil sulfona (o sulfona dimetílica).



propanoato de metilo



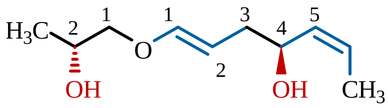
dietil éter
(éter dietílico)
o etoxietano



etil metil cetona
(cetona etílico-metílica)
o butan-2-ona

9 ESPECIFICACIÓN DE LA CONFIGURACIÓN DE LOS ESTEREOISÓMEROS

Los estereoisómeros se diferencian entre sí mediante estereodescriptores citados en los nombres y asignados de acuerdo con las reglas de Cahn-Ingold-Prelog (CIP).[9,10] Los descriptores más comunes son los que designan la configuración absoluta de centros estereogénicos tetraédricos (*R*/*S*) y los que designan la configuración de dobles enlaces (*E*/*Z*). Los localizadores se agregan para definir las ubicaciones de los centros estereogénicos y el conjunto de descriptores se incluye entre paréntesis.

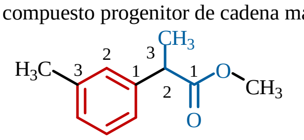


(1*E*,4*S*,5*Z*)-1-[(2*R*)-2-hidroxipropoxi]hepta-1,5-dien-4-ol

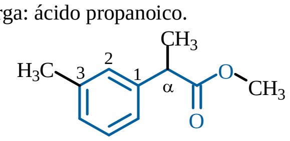
En casos especiales se utilizan otros estereodescriptores (p. ej. *cis*/*trans*, *M*/*P*, *C*/*A*). Los descriptores sin cursiva α/β y D/L (versalitas) se usan comúnmente y solo para productos naturales, aminoácidos y carbohidratos.

10 NOMENCLATURA DEL CHEMICAL ABSTRACTS SERVICE (CAS)

El CAS mantiene un registro de sustancias químicas recopiladas de las publicaciones.[11] En el sistema CAS, los compuestos se nombran utilizando métodos similares, pero no idénticos, a los de la IUPAC. La diferencia más destacable es el uso del "CA Index Names", los cuales se citan en el índice en un orden especial inverso que se diseñó para la creación de índices alfabéticos de nombres químicos (NOTA. Se recomienda no alterar esta nomenclatura con traducciones a otros idiomas pues se pierde el valor original del sistema). El CAS utiliza también la nomenclatura conjuntiva, en la cual los compuestos progenitores se combinan para formar un compuesto progenitor nuevo mayor. En el ejemplo, el nombre progenitor conjuntivo es el ácido bencenoacético (nombre sustitutivo correspondiente: ácido fenilacético), mientras que el nombre sustitutivo recomendado por la IUPAC para este ejemplo se basa en el compuesto progenitor de cadena más larga: ácido propanoico.



(1)



(2)

Nombre IUPAC:	2-(3-metilfenil)propanoato de metilo (1)
Nombre CA:	α,3-dimetilbencenoacetato de metilo (2)
(En inglés	methyl α,3-dimethylbenzeneacetate)
En el índice inverso:	ácido bencenoacético, α,3-dimetil-, éster de metilo
(En inglés:	benzeneacetic acid, α,3-dimethyl-, methyl ester)

Otras diferencias incluyen la posición de los localizadores y estereodescriptores, así como algunos procedimientos de nomenclatura específicos.

11 REPRESENTACIÓN GRÁFICA

Las fórmulas estructurales de los compuestos químicos orgánicos se dibujan generalmente de acuerdo con la convención en zig-zag como se ha ilustrado ampliamente con anterioridad.[12] En esta convención, todos los átomos de carbono (y los átomos de hidrógeno unidos a ellos) unidos al menos a otros dos átomos que no sean hidrógeno se representan por la intersección de dos líneas que representan enlaces. No se deben omitir los átomos de hidrógeno unidos a heteroátomos. En estas representaciones gráficas, cada extremo de una línea, ángulo e intersección representa un átomo de carbono con sus correspondientes hidrógenos. Se utilizan convenciones especiales para representar la configuración de los centros estereogénicos y los dobles enlaces.[13]

---

[9] R. S. Cahn, C. Ingold, V. Prelog, Specification of Molecular Chirality, *Angew. Chem.* **78**, 413–447 (1966); *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **5**, 385–415 y 511 (1966).

[10] V. Prelog; G. Helmchen, Basic Principles of the CIP-System and Proposals for a Revision, *Angew. Chem.* **94**, 614–631 (1982); *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **21**, 567–583 (1982).

[11] Chemical Abstracts Service, https://www.cas.org.

[12] J. Brecher *et al.*, Graphical representation standards for chemical structure diagrams, *Pure Appl. Chem.* **80**(2), 277–410 (2008).

[13] J. Brecher *et al.*, Graphical representation of stereochemical configuration, *Pure Appl. Chem.* **78**(10), 1897–1970 (2006).